

# 研究領域「力学機能のナノエンジニアリング」事後評価（課題評価）結果

## 1. 研究領域の概要

本研究領域では、超スマート社会や持続可能で豊かな社会を実現するための基幹技術である材料開発をターゲットとして、材料の基本物性である力学特性の発現機構をナノスケールから理解することや、ナノスケールの変形や構造変化に由来する力学特性を利用した新たな材料機能を創出すること（ナノエンジニアリング）によって、発展性の高い材料設計指針を獲得することを目指します。

具体的には、各種材料（金属材料、無機材料、有機材料など）において、強度特性等を決定している支配因子やそのメカニズムについてのナノスケールからの解明と、それに基づく機能創出を進めます。また、同スケールにおける力学特性を主とした他の物理特性（熱物性、磁性、導電性など）との相関性に着目した新奇な機能創出も対象に含めます。これらの目的の達成のため、その場計測下の力学実験技術、力学解析法、シミュレーション技術等を発展させ、ナノ材料からマクロ材料の共通基盤であるナノスケールの力学学理の展開と多様な特性解明への解析評価技術の確立を推進します。さらに、基礎研究の結実として、材料の高機能化や新機能創出につながる材料設計指針を獲得することを目指します。

物理学や化学等のナノスケールの現象への理解に特長がある研究分野と機械工学や材料工学等の機能の発現機構や構造の理解に特長がある研究分野の融合を通じて、異種材料間の相違点や共通点を見出すことでナノ材料力学に関する普遍的な学理構築や新分野の開拓に貢献します。

## 2. 事後評価の概要

### 2-1. 評価の目的、方法、評価項目及び基準

「戦略的創造研究推進事業(先端的低炭素化開発を除く。)の実施に関する規則」における「第4章 事業の評価」の規定内容に沿って実施した。

### 2-2. 評価対象個人研究者及び研究課題

#### 2019年度採択研究課題

- (1) 稲邑 朋也（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）  
無拡散変態ナノ組織の幾何と形状記憶特性
- (2) 畝山 多加志（名古屋大学大学院工学研究科 准教授）  
疑似自由度を用いたメソスケール粗視化モデリング
- (3) 近藤 俊之（大阪大学大学院工学研究科 講師）  
金属薄膜の強度発現を担う外的・内的寸法効果の解明
- (4) 篠崎 健二（産業技術総合研究所ナノ材料研究部門 主任研究員）  
ナノスケールの組成ゆらぎ設計による超低脆性ガラスの創製
- (5) 鈴木 凌（横浜市立大学理学部 助教）  
タンパク質結晶の転位論に基づく力学特性の解明
- (6) 多根 正和（大阪公立大学大学院工学研究科 教授）  
ゆらぎ誘起原子シャッフリングの格子動力学と変形挙動との相関
- (7) 垂水 竜一（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）  
材料多様体のマルチスケールメカニクス
- (8) 都留 智仁（日本原子力研究開発機構原子力科学研究部門 研究主幹）  
転位芯の局所自由度を有する力学理論に基づく新奇機能の創出
- (9) 栃木 栄太（東京大学生産技術研究所 准教授）  
変形・破壊現象の原子スケール解析

- (10) 中村 篤智 (大阪大学大学院基礎工学研究科 教授)  
無機半導体材料の力学特性に及ぼす光環境効果のマルチスケール計測と機能開拓
- (11) 三輪 洋平 (岐阜大学工学部 教授)  
イオン架橋の動的特性制御によるポリマー材料の高機能化

#### 2-3. 事後評価の実施時期

2022年2月 各研究者からの研究報告書に基づき研究総括による事後評価

#### 2-4. 評価者

##### 研究総括

北村 隆行 京都大学 理事・副学長

##### 領域アドバイザー

荒井 政大 名古屋大学大学院工学研究科 教授

幾原 雄一 東京大学大学院工学研究科 教授

伊藤 耕三 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

岩崎 富生 (株)日立製作所研究開発グループ 主管研究員

加藤 仁一郎 AJS (株) ICTイノベーション事業部 副本部長

栗村 隆之 三菱重工業 (株) 総合研究所 主席研究員

志澤 一之 慶応義塾大学理工学部 教授

澁谷 陽二 大阪大学大学院工学研究科 教授

田中 勝久 京都大学大学院工学研究科 教授

津崎 兼彰 物質・材料研究機構 フェロー

西脇 眞二 京都大学大学院工学研究科 教授

平山 朋子 京都大学大学院工学研究科 教授

吉江 尚子 東京大学生産技術研究所 教授

##### 外部評価者

該当なし

### 3. 総括総評

#### 本領域の特徴

優れた機能や潜在力を有する個別の材料については、従来から深い研究がなされてきている。一方、力学は強度特性を軸として、異なる材料に共通する法則を探求する指向性を有している。本領域の特徴は、力学を横糸として材料機能をナノスケールから理解して、材料の力学特性を中心とする新たな設計指針を研究しようとするところにある。

また、本領域では異なる分野の研究者が参加することから、「一歩外へ」を合言葉に、自分の専門領域外の材料や解析・計測・シミュレーション技術に関心を持ち、他研究者の考え方を知って知識を広めながら、自己の研究課題に対する考え方をしっかりと固めつつ実際の研究を進めることを、研究者育成方針とした。

#### 採択課題の選考

1年目は、バリエエティに富んだ各種材料や評価・解析技術に関して189件の応募（採択倍率17倍）があった。その中には、近年の基盤技術の発展を背景とした優れた顕微鏡技術や数理解析技術を中心とした提案も含まれていた。選考は、「研究領域の概要」で期している目標について、研究内容の独創性や挑戦度合、専門分野におけるベースとなる考え方や知識、ナノ材料力学領域の学術的発展への寄与度、などを総合的に考慮して決定した。

#### バーチャル研究所としての運営

研究開始後半年でコロナ禍に入ったことにより、その前に全員リアルで話し合うことができたのは、領域会議1回、研究会1回のみであった（その後は、最終年度の秋に集まることができた。）そこで、「一歩外へ」の精神を涵養すべく、(1)領域会議を地区ごとに人数制限を設けてリアル（他の研究者はリモート参加）で行う、(2)サイトビジットは各研究者3回（リアル2回、リモート1回）ずつ行い、個別課題について集中的な議論を行う、(3)徹底討論会（1人1時間講演1時間討論）を10回（各回2人）開催して、出席者全員が必ず議論に参加する、(4)壁に突き当たっている研究者への個別アドバイスを実施する、(5)学会誌（日本材料学会）に各研究者のレビュー論文特集号を企画して研究の考え方を記述する、(6)学会での特別セッションを通じての講演会の企画・実行、などの工夫をして、研究者に合わせたきめ細やかな育成に心がけた。

#### 研究の成果

コロナ禍のために研究実行への支障を懸念したが、結果的に当初のねらいどおり優れた成果をあげた。個々の課題についての成果の詳細については、各研究課題の事後評価に示している。基礎的な知見を基に、実際的な具体的な材料設計方法の提示に至っているものもあり、産業界から多くの相談が寄せられている課題が数件ある。他方、連続体力学の適用下限近傍に関する力学理論や複雑材料・現象に対するメソスケールの力学など、学術の視点から果敢な挑戦によってその将来基盤を提示した課題もある。また、これらの考え方を領域研究者全員が共有できたことも大きな成果であり、将来の協働への基盤財産を形成することができた。

なお、コロナ禍のために国際的な活動が制限されたことは、各研究者の発展を考えると、大きな痛手であった。

#### 今後への期待

力学という固有の材料を越えた学術を横糸とすることによって、自己の研究の殻を破ろうとする発想が生まれつつある。1期生を中心として、さきがけ研究者の間で材料を越えた自主的研究会が3つ形成されており、活発に活動している。また、CREST「ナノ力学」に参加する研究者も多く、CREST研究者との交流を通じて材料力学分野の発展および活性化を期待したい。

1期生は、応募直前に昇任したもの（3名）以外のほとんど（8名中7名）が本さきがけ研究期間中に昇任を果たした。これは、本研究領域に寄せられる学術界や産業界からの期待を示している。これに応えるべく、各研究者が本領域での経験を基盤として、他分野他技術への好奇心やコミュニケーション能力を発揮し、PIとしてナノ材料力学研究分野をリードすることによって学術発展および社会貢献に邁進することを望む。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 無拡散変態ナノ組織の幾何と形状記憶特性

2. 個人研究者名

稲邑 朋也（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）

3. 事後評価結果

形状記憶合金における機能の劣化は、マルテンサイト変態のサイクルにおける正・逆変態過程およびドメイン構造スイッチング過程において生成される転位の累積に起因している。転位が生成されない条件として、ドメイン間のひずみ・ねじれをなくすことが考えられる。本研究では、このひずみ・ねじれが生じないドメイン間の幾何学条件を明らかにすることによって、劣化のない形状記憶合金の材料設計指針を得ることである。また、その実験的実証も行う。

各マルテンサイトバリエーション間には整合性がきわめて高い双晶関係を満たすとした上で、それらの界面が集まる3重点において格子間のねじれ（回位）が消失する幾何学的条件（コンパチブル条件）を数理解析によって導出することに成功した。また、任意の体積率で本条件を満たす微視組織の形成が可能であることを幾何学的に証明した。これらの理論的ベースの確立を高く評価する。

本研究が開発した高機能形状記憶合金の電子顕微鏡観察より、各ドメイン間の双晶界面で構成された微視組織であること、および、それらの界面が集まる3重点における各ドメイン間のねじれ（回位）角度が小さいことを、明らかにした。また、本合金が長寿命であることも実証している。すなわち、ドメイン間の格子の整合性を高めることによって、変態サイクルによる機能低下を防ぐことができることを実証した。理論の導出のみならず、実証に成功していることを高く評価する。

今後の展開と期待

形状記憶合金の産業利用が進まない主な原因は、繰り返し駆動による機能の劣化であった。本研究によって合金の格子定数等の幾何学的材料設計指針は明確になっており、その社会実装の段階に至っている。このブレークスルーによって、産業界と協働しての社会的貢献が大いに期待できる。知財戦略の視点からの進展も望みたい。

また、力学的には核生成・成長過程の解析や数値シミュレーションによって、材料力学における重要な課題のひとつである微視組織の影響に関する基盤的知識が得られるとともに、材料設計のさらなる高度化の指針になると期待している。

さらに、変態等において多数の界面で構成される微視組織が現れる結晶材料は形状記憶合金に限らず数多くあり、そのマクロ特性や機能が局所のひずみ・ねじれに敏感であるものもある。本研究の考え方は、他材料・他条件への発展性を有している。研究のアイデアと積極果敢な姿勢は目を見張るものがあり、数理的センスに優れていることから、その長所を活かした挑戦姿勢を貫いていただきたい。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 疑似自由度を用いたメソスケール粗視化モデリング

2. 個人研究者名

畷山 多加志 (名古屋大学大学院工学研究科 准教授)

3. 事後評価結果

高分子などのソフトマターは、原子・メソ・マクロスケールといった多段の階層構造を有する。特に、そのマクロ物性を理解するには、ナノ・メソスケール構造の適切なモデル化が鍵となる。本研究は、その合理的な粗視化モデルの開発を目的としている。具体的には、従来は時間に依存しないとされてきた量を時間に依存する新たな疑似自由度として取り扱うことで、これまでは粗視化できなかった特性を合理的に表現して、シミュレーションを可能にすることができる。

マイクロ運動モデルから過渡ポテンシャルに基づく一般モデルの導出に成功した。ここで、マイクロ運動モデルとしては、過減衰 Langevin 方程式によるものと、Hamiltonian 正準方程式によるもの、の2種類を導出した。この理論により、運動モデルが時間とともに確率的に発展する粗視的状況を合理的にシミュレーションできるようになった。これらの粗視化シミュレーションの基盤となる理論および方法論の開発を高く評価する。

本理論がからみあい高分子の物性シミュレーションに広く適用できるものであることを示した。また、既存の手法では困難であった過冷却高分子や結晶性高分子材料のモデル化や解析に有効であることを示した。理論や枠組みの実際的な有効性を示したことは、高く評価できる。

さらに、拡散係数を疑似自由度とするモデルの導出も行い、単純な気体系でその有効性を確認している。考え方の発展性を示したものであり、大きな潜在力を示している。

今後の展開と期待

本研究で完成した粗視化モデル構築方法の理論基盤を、具体的対象に広げることが望まれる。統計力学的妥当性を保証された本理論に基づくシミュレーションと実際の物性との対比により、各種ソフトマターの力学特性のメカニズム解明やメカニクス解明が大いに期待できる。そのためには、他の研究者や技術者が理解しやすく扱いやすい形に整備することも大切である。多岐にわたる理論への深い造詣とそれを統合する能力があり、本研究の発展・展開とともに他研究者への本理論の波及を望む。ただし、材料は複雑な対象が数多く存在するため、自身としては興味が発散しないようにしたい。

実際の材料やその物性解析においては複雑な階層性が存在する場合は想定され、本理論をベースとしたさらなる深化が大いに期待される。特に統計力学的効果は、材料を問わず存在する課題であり、知識や人間力に優れていることから、他材料の研究者とも連携して統計力学に重点をおいた分野の拡張をリードすることを強く期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 金属薄膜の強度発現を担う外的・内的寸法効果の解明

2. 個人研究者名

近藤 俊之（大阪大学大学院工学研究科 講師）

3. 事後評価結果

ナノ薄膜材料の強度特性に強い影響を及ぼす寸法因子として、膜厚（外的構造寸法）と結晶粒径（内的構造寸法）がある。本研究は、金属薄膜を対象として両因子を個別に制御した材料を作製し、両因子の影響を分離してナノ材料特有の強度特性の発現に関するメカニズム・メカニクスを明らかにすることを目的としている。

熱処理等の薄膜作製技術に工夫を加えて、数十 nm からミクロンオーダーの異なる膜厚の銅薄膜に対して異なる結晶粒径を付与することに成功した。また、それらを自立薄膜として取り出し、膜単体での強度実験を可能にした。

薄膜の引張強度実験より、転位の挙動に関する基本特性を示す降伏応力の両因子依存性を明らかにした。膜厚が薄くなると降伏応力は大きくなり、同膜厚の場合には結晶粒径が小さくなるとともに降伏応力は上昇する。ただし、膜厚が薄くなるとともに、粒径依存性は弱くなる。困難な実験を精密に行い、基本的な強度特性を明らかにした成果は、高く評価できる。

さらに、薄膜に切欠きまたはき裂を導入した試験片に引張および繰返し負荷を行い、微視組織に着目しつつナノ材料の靱性および疲労き裂伝播特性等の破壊力学的実験手法を確立したことは評価できる。最終盤に得られたこれらの成果をまとめて、発表することが望まれる。

今後の展開と期待

微小材料の強度は、表面（形状：外部構造）と微視組織（内部構造）に強い影響を受ける。本研究は、そのメカニクス・メカニズムを解明するために必要な実験手法の基盤を与えるものであり、それらの因子を考察できる力学解析を行うことによって、一層の進展が可能である。また、他の強度現象への適用を通じて、それらの力学モデル化に対する基礎的な知見を得ることができると期待できる。卓抜な実験能力、および、困難を克服する粘り強さを有しており、地道な研究のさらなる進展を望む。

局所のひずみ等の精密計測など、両因子に着目した微視組織スケールの実験手法の深化を望みたい。これによって、両因子による変形・破壊過程のメカニズムを明らかにすることができるとともに、微視組織に関するメカニクスの基盤としての定式化に寄与するものと大いに期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ナノスケールの組成ゆらぎ設計による超低脆性ガラスの創製

2. 個人研究者名

篠崎 健二（産業技術総合研究所ナノ材料研究部門 主任研究員）

3. 事後評価結果

ガラスの脆い強度特性を改善するために、き裂発生・進展を抑制する二つの方法による高靱性化を目的としている。一つは、拡散により均質化過程を調整することによって、熱力学的平衡条件では得られない巨大な空間ゆらぎによってき裂耐性が高い領域を導入する方法である。もう一つは、延性が高い金属のナノ粒子を分散させることで、き裂先端の応力集中を緩和する方法である。

高強度と延性のそれぞれに優れた2種類のガラス粒子の複合体の短時間加熱によって、巨大空間ゆらぎ構造を有するガラス材料の合成に成功した。このユニークなアプローチを開発するとともに、それによってき裂発生を抑制できることを実証したことは、高く評価できる。また、本手法を市販ガラスに適用して、き裂耐性を高めることができることを示したことも大いに有用である。

ガラス中に微量の金属ナノ粒子を分散析出することに成功した。また、ごく微量であっても顕著にき裂発生を抑制することを示した。開発した材料は、き裂成長も抑制し、破壊靱性を高める効果を有することも明らかにした。さらに、その微視的なメカニズムの解明を進めたことも高く評価できる。

今後の展開と期待

本研究で行った方法は、両者ともガラスのき裂耐性のための材料開発アプローチとしてユニークなものであり、社会実装に向けた企業等との実践的な連携が大いに期待される。本研究で得られた経験を材料設計指針として確立するとともに、知財戦略としても整備しておくことが望まれる。社会実装を視野に入れたセンスの良い研究を行っており、よりいっそうの発展を期待している。

空間的ゆらぎや複合化の効果を探求することは、強度の本来の由来をナノスケールから考察する上で重要な要素であり、他材料を含めたナノ材料力学の有力な発展方向のひとつである。それは新たな材料設計指針にも繋がると考えられる。卓抜なアイデアと精緻な実験能力を有しており、本研究を基に他材料を含めた研究者と協働して、ゆらぎや複合化と強度特性に関する大きな分野を育てる活動を望みたい。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： タンパク質結晶の転位論に基づく力学特性の解明

2. 個人研究者名

鈴木 凌 (横浜市立大学理学部 助教)

3. 事後評価結果

生体高分子である数十 nm から数百 nm の巨大分子から構成されるタンパク質結晶の負荷による塑性変形機構を実験実測によって明らかにすることを目的としている。通常の結晶材料と比べて本材料の特徴は、結晶格子が数百倍以上に大きいこと、分子間の結合が弱いこと、多量の水分子を含んでいること、である。特に本研究では、タンパク質結晶の変形特性を結晶材料で知られている転位論に基づいて検討を行うことに大きな特徴がある。

放射光施設のビームラインに負荷装置を組み込み、X 線トポグラフィによってタンパク質結晶の変形挙動を観察することに成功した。この実験より、転位生成・運動を特定するとともに、転位生成に必要な臨界せん断応力を明らかにした。すなわち、タンパク質結晶の塑性変形の基本的なメカニズムとメカニクスを世界に先駆けて明らかにしたことは、高く評価できる。

一般的にタンパク質結晶は脆い強度特性を有しているが、その強化法として水和ゲルを用いる方法について研究した。ゲルによって弾性係数は変化しないのに対して、破壊応力は大きく改善されることを示した。ゲルの網目構造が亀裂等による破壊の進行を抑止する効果があることを示唆しており、今後の強化指針のひとつとなると考えられる。独創性の高い発想により新たな強化指針を世界にさきがけて示した成果は、高く評価できる。

今後の展開と期待

タンパク質結晶に関する微視的（ナノスケール）な変形・破壊メカニズムについて、本研究で解明した他結晶材料との類似性や相違点等の基本枠組みは、他のタンパク質結晶材料の力学特性を研究する基盤となると期待できる。積極的な展開を望みたい。ただし、タンパク質結晶の詳細なメカニクスについては未解明な点も多く、基礎研究が今後も必要である。アイデアの卓越性のみならず、優れた実験・解析能力を有していることから、地道な継続による新規分野の開拓が大いに期待される。そのためには、力学に基づいた正確な試験方法や観察方法の開拓も重要である。

さらに、タンパク質結晶の強化方策の端緒がつかめたことは、バイオマテリアル等の応用への材料機能の発展性を示すものである。特に、単に強度の高いものを良いとするだけでなく、生分解性などの弱い強度も材料機能として重要な視点である。強度コントロールに関する材料設計指針としての発展・充実が大いに期待できる。産業応用へも視野に入れた発展が可能である。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ゆらぎ誘起原子シャッフリングの格子動力学と変形挙動との相関

2. 個人研究者名

多根 正和（大阪公立大学大学院工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

統計的ゆらぎによって合金中の局所的な組成は位置によって異なっている。このような空間的な組成ゆらぎによって生じる安定化元素の少ない領域に原子シャッフリングが生じ、それを起点とした相変態が進行する場合がある。本研究では、Ti合金のオメガ変態を対象として、動的な原子シャッフリングが力学特性に及ぼす影響や、それに起因する相転移プロセスを明らかにすることを目的としている。さらに、弾塑性変形とその相転移の関係性を明らかにして、力学モデルを構築する。

内部摩擦の温度依存性から、動的な原子シャッフリングの活性化エネルギーはガウス分布に従ってブロードに分布していることを明らかにした。そして、これらの空間的ゆらぎに起因する原子シャッフリングや相変態のメカニズム・メカニクスを解明して力学モデルとすることに成功した。この成果を高く評価する。また、添加元素による合金組成の空間ゆらぎに関する熱力学解析より、これらの構成元素依存性が原子間相互作用に起因することも明らかにした。

上記の動的原子シャッフリングが弾性変形特性に強く影響するメカニクスを解明したことも、高く評価する。

さらに、塑性変形が動的な原子シャッフリングによるオメガ変態を促進することを示すとともに、シャッフリングの低活性化エネルギー領域は双晶変形が生じやすいことから、ゆらぎに起因する双晶変形の力学モデルを導出した。

今後の展開と期待

本研究によって得られた空間ゆらぎに関する微視的メカニズム・メカニクスは、今後の材料力学の発展方向のひとつである統計力学的視点に基づく考え方の基盤形成に寄与するものである。原子レベルの視点からの直接的な解析への深化など、学術的に多くの派生が大いに期待できる。また、Ti合金以外の材料における空間的なゆらぎに起因する強度等の特性・機能に関するメカニクスへの発展が望まれる。ゆらぎと微視組織・微視構造との関係など、金属材料に限らない視点もある。材料力学への深い理解とバランスのよい実験・解析能力を有しており実行力にも優れていることから、他材料の研究者との協働による発展が強く望まれる。

また、本研究で確立したモデルに基づいて、合理的な材料設計法としての定着が必要である。そのためには、添加元素等を考慮した原子シャッフリングの制御に繋がるきめ細かい条件設定による実証実験や原子レベル解析が大切である。また、これは変態を通じた微細組織制御や変形制御への発展性も期待できることも示している。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 材料多様体のマルチスケールメカニクス

2. 個人研究者名

垂水 竜一（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

連続体力学をベースに、多様体論と微分幾何学を駆使して、ナノスケールの構造を有する固体材料の力学を主とする物理特性を定式化するための基本的枠組みを構築することを目的としている。特に本研究では、結晶材料中の格子欠陥（転位や回位）を対象とした定式化に注力し、大規模数値シミュレーションによって、ナノスケールの力学特性を詳細に解析した。また、ナノ材料への適用も行った。

リーマン・カルタン多様体を用いた格子欠陥の数学的定式化に成功した。ナノスケールにおける力学理論の基盤となるものであり、その導出を高く評価する。また、数値シミュレーションへの適用を達成し、らせん転位芯近傍および刃状芯転位近傍の応力場の詳細を明らかにした。これによって、従来の解析で困難であった転位芯近傍の応力特異性の問題を解消して、ナノスケールの力学問題に対する有効性を示した。さらに、転位と回位の等価性など、基本的枠組みに基づく解析の発展性を示したことも高く評価できる。

上記定式化によって、表面の影響を組み込むことができるようになった。これは、ナノ構造体に影響が大きい形状の影響を含めた解析が可能な方法を意味しており、その成果を高く評価する。この方法に基づいて、らせん転位を含むナノワイヤーの数値シミュレーションを行って、新しいトポロジカル格子欠陥を発見している。

今後の展開と期待

基本的枠組みは完成しているので、ナノスケールで生起する力学を中心とした現象への積極的な適用によって、そのメカニズム・メカニクスへの深い理解が進展すると大いに期待している。特にナノスケールでは、形状（外部構造）と格子欠陥（内部構造）の相互作用が強く表れると考えられるため、強力な解析基盤となる。

また、ナノ力学の全体像の中では、第一原理をベースとした力学解析との関連性や接続性についての考察も重要な課題であり、その展開を大いに期待している。さらに、連続体をベースにしていることからマルチフィジックスに関する要素も取り入れることができる可能性を有している。

さきがけ「ナノ力学」チームの解析に関する自主研究会の中心であり、リーダーシップおよび企画力に優れている。卓抜した見通しと解析能力を有しており、研究の発展を望むとともに、ナノ力学分野を開拓・牽引していくことを強く期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 転位芯の局所自由度を有する力学理論に基づく新奇機能の創出

2. 個人研究者名

都留 智仁（日本原子力研究開発機構原子力科学研究部門 研究主幹）

3. 事後評価結果

金属材料の塑性変形は、原子レベルの欠陥である転位の運動により生じる。本研究は、第一原理解析の結果を参考にしつつ電子結合の寄与や局所構造などの転位の自由度に着目して、個々の転位構造を理解してその運動を支配する原子レベルのメカニズムや力学因子を解明することを目的としている。また、それに基づいて有限温度における転位運動を合理的にシミュレーションできる技術も開発する。

転位芯近傍の弾性場から得られる変位場を導入した原子系モデルを作成し、転位芯と合金元素の相互作用エネルギーやPeierlsポテンシャルなどの転位運動に関する基礎特性を簡便に評価できることを示した。また、転位運動をキンクの形成と運動の2つの熱活性化過程の複合とするモデルを提案し、合金元素の種類や濃度に対しての転位運動を予測することを可能にした。複雑な力学過程を明らかにした本成果を高く評価する。さらに、転位運動を高速でシミュレーションできる手法も開発し、今後の発展性が期待できる。

合金の物性を左右する合金元素近傍の転位運動を解析することに成功し、元素の種類や濃度による特性への影響を明らかにした。これは、合金の材料設計に大きく寄与できる基盤を確立したことを意味し、その成果は高く評価できる。

今後の展開と期待

通常の合金に対してねらい通りの多くの成果が得られており、有用性が高い。本研究をベースとして、具体的な合金設計指針としての発展が望まれる。また、大規模なシミュレーション等による大域的な解析への発展方向もある。

一方、近年の進展が著しい多元系固溶体合金は、合金構造自体の複雑性の中に存在する原子レベル欠陥構造（転位構造）の解析となる。本研究の手法はベースになるものの、複雑性のレベルは格段に高い。このような高度に複雑な多元系化学組成の組合せは、材料力学の発展方向のひとつである複雑性の本質を内包している。その機能特性を解析する手法を開発するために、合金材料構造の複雑性と欠陥周辺構造複雑性を整理するなど、新たな考え方やアプローチへの挑戦を望む。ただし、興味が発散しないようにしたい。それに必要な優れた解析能力と他研究者との高いコミュニケーション能力を有しており、分野の開拓をリードすることを望む。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 変形・破壊現象の原子スケール解析

2. 個人研究者名

栃木 栄太（東京大学生産技術研究所 准教授）

3. 事後評価結果

高分解能透過型電子顕微鏡に組み込める精密な負荷装置を作製して、負荷条件下における結晶材料の格子欠陥の動的な挙動を原子分解能でその場観察する手法を開発する。さらに、それを用いて、結晶材料の変形・破壊過程における局所ひずみやき裂発生・進展様相を原子レベルから明らかにするとともに、ナノスケールの力学特性を明らかにすることが目的である。

微小電気機械システム(MEMS)技術によって負荷条件下の原子分解能観察が可能な荷重負荷デバイスの開発に成功した。また、試験片形状や把持方法等のナノスケール強度実験手法を開発するとともに、負荷に伴う原子像の変化より、変位を同定して局所のひずみを評価することに成功した。これらのきわめて精密な実験・観察手法の開発は、材料強度のメカニズム・メカニクス解明に対して多くの適用が考えられ、その成果を高く評価する。

上記の手法を用いて、金の積層欠陥構造の形成過程を原子スケールで明瞭に観察した。また、不動転位の分解による稼働転位化などの塑性変形の基礎に関する詳細なメカニズムについて、従来の常識では考えられなかった新たな知見を得たことも高く評価できる。さらに、イオン結晶の破壊過程観察より、エネルギー的に安定な破面形成メカニズムを明らかにするなど、その多様な強度現象に対する発展性を示した。

今後の展開と期待

新奇機能を有する材料の開発・設計過程においては、負荷条件下の高分解能観察が求められることが多い。また、既知の材料・現象であっても、それらを本質的に理解するためには、詳細観察が必要である。本研究の成果は、材料の基礎研究として学術的利用価値がきわめて高く、多くの材料や現象への発展を期待する。さらに、ナノデバイス等の産業界における微小材料設計指針を検証・開発する上でも、基盤的技術となると考えられる。

広く結晶材料一般に適用できる手段であるが、本研究者の発展についてはターゲット対象（例えば、材料または現象）を絞り込んだメカニクス・メカニズム探求が大切である。それが、学術的深化をもたらすとともに、さらなる手法高度化の指針ともなりうると強く期待する。優れた実験技術および開発能力を有しており、原子レベルの強度発現メカニズムとそのメカニクスを結び付ける研究を望みたい。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 無機半導体材料の力学特性に及ぼす光環境効果のマルチスケール計測と機能開拓

2. 個人研究者名

中村 篤智（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

特定の無機半導体材料において、光環境の制御によってきわめて大きな塑性変形を生じる衝撃的な現象を、本研究者が発見した。ただし、無機化合物半導体の多くは、通常の強度実験を行うサイズのサンプルが作製できないため、多種の材料について詳細な実験が困難である。そこで、本研究では光環境下での微小な無機半導体結晶の強度評価実験装置および実験手法を確立することを目指した。さらに、それを用いた実験より、無機半導体材料の変形・破壊のメカニズムを明らかにするとともに、そのメカニクスを原子・電子レベルから検討することを目的としている。

光を2方向から圧子直下に定量照射できる機構をナノインデンテーション装置に組み込んだシステムを開発した。このシステムを用いた硫化亜鉛に対する実験より、光環境は転位運動に強く影響するが、転位生成には影響しないことを初めて明らかにした。これは、塑性変形に関する基本となる成果であり、学術的に高く評価できる。

また、時間に依存した変形（クリープ）に着目して、光の on/off を制御した負荷一定実験より、室温における転位の運動特性を抽出した。クリープ現象に着目し、それによってメカニズム・メカニクス解明に至る研究を高く評価する。さらに、光環境によって、き裂の進展挙動が変化することを初めて示し、光環境が破壊靱性にも影響することを明らかにしたことは、破壊力学の観点から大きな価値がある。

さらに、転位による半導体結晶の蛍光発現についての研究にも進展が認められる。

今後の展開と期待

光環境が強度特性に及ぼす顕著な影響は、従来の無機半導体材料の変形・破壊に関する常識を越えたものであり、多くの材料に対して光環境を精密に制御した条件下で強度実験を行う必要がある。本研究で開発したシステムは簡便であり、それに大きく貢献できると期待される。さらに、自動化を含めた能率的な評価システムによってデータ解析のベース構築も有望な発展方向である。

光環境による転位運動特性の解明には、電子・原子レベルの詳細なメカニズム・メカニクス解析が必要である。さらに、無機半導体材料は多様なマルチフィジックス特性を有しており、今までの研究を拡張して、量子力学に基づく解析と協働した実験への発展も大いに期待される。

独創的なアイデアとそれを実行に移す高い研究能力を有しており、マルチフィジックスを含む新たな材料力学分野の開拓を期待する。また、さきがけ「ナノ力学」チームにおける実験グループの自主研究会の中心メンバーとしての活躍も評価できる。広い材料に関する深い洞察力と実験能力を有しており、今後の分野リーダーとしての発展を期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： イオン架橋の動的特性制御によるポリマー材料の高機能化

2. 個人研究者名

三輪 洋平（岐阜大学工学部 教授）

3. 事後評価結果

ポリマーに結合するイオン基の凝集により動的に架橋したエラストマーを対象として、その強度特性に関する微視的メカニズムおよびメカニクスを解明することを目的とした。具体的には、本材料の特徴である、(1)イオン基の相互作用を通じて動的ネットワーク挙動を容易に制御できること、(2)分子構造および架橋構造がシンプルであること、を活かして、負荷変形時の分子スケールでの挙動や構造変化を解析した。また、その知識を基盤としてユニークで豊かな物性の発現を目指す材料設計法の確立に挑戦した。

引張り負荷下のイオン架橋エラストマーの分解 X 線散乱より、応力に比例して凝集体サイズが縮小することを発見し、局所の応力集中によって強靱化する本材料のメカニクスを解明した。この強度に関する基盤的成果を高く評価する。

ポリマーとイオン基の相分離によってネットワーク構造が形成されることに着目し、イオン基に変えてフッ素成分を用いた構造を作製し、きわめて短時間での自己修復性を示すことを発見した。このメカニクス発見によって、自己修復性に関する新たな材料設計方針を得た。論理的な材料設計により豊かな材料特性を導く優れた取り組みである。

CO<sub>2</sub> ガスによって、素早く可逆的に軟化する動的架橋エラストマーや、弾性率および伸びが大きく増加するエラストマーを開発し、ガスによる力学特性制御への道を開いた。また、その基本的なメカニクスを実験的に明らかにした。新たな材料機能への展開が大いに期待される成果であり、材料設計法として高く評価する。

今後の展開と期待

イオン架橋自己修復エラストマーの力学特性を産み出すメカニクスや、相分離によるネットワーク構造形成に関する知見によって、材料設計に関する基本的な考え方が提示されている。今後は、これに沿った具体的な設計や作製を通じての社会実装が大いに期待される。産業界との協業も有望である。また、知財戦略としての整備も望まれる。

気体によって材料特性を制御するアイデアは材料開発の新機軸を開くものであり、今後の展開および分野としての成長が大いに期待される。柔軟な発想と優れた実行力を兼ね備えており、今後の進展を大いに期待している

学術面も優れた知識を有しているため、材料の強度特性に関する微視的メカニクス・メカニクスについての基礎的な探求の継続を望みたい。複雑で動的な内部構造から発現する特性に対する材料の体系的・合理的な開発指針を得るには、その探求が重要な位置を占める。